

University of Groningen

Structure and fragmentation of $C_2H_5S^+$ and $C_3H_7S^+$ ionen in the gas phase

Broer, Wicher Jan

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

1979

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Broer, W. J. (1979). *Structure and fragmentation of $C_2H_5S^+$ and $C_3H_7S^+$ ionen in the gas phase*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

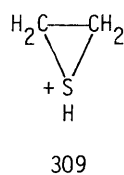
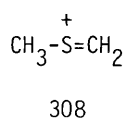
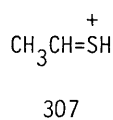
Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

S A M E N V A T T I N G

In dit proefschrift worden de resultaten beschreven van een onderzoek naar de isomerisatie- en ontledingsreacties van $[C_2H_5S]^+$ - en $[C_3H_7S]^+$ -ionen in de gasfase. Deze reacties zijn onderzocht met behulp van een dubbelfocuserende massaspectrometer.

De principes van massaspectrometrie worden in Hoofdstuk 1 besproken, waarna in Hoofdstuk 2 wordt ingegaan op de methoden die voor de structuuropheldering van ionen in de gasfase ter beschikking staan.

In Hoofdstuk 3 worden de isomerisatie- en fragmentatiereacties van $[C_2H_5S]^+$ -ionen besproken. Het blijkt, dat ionen 307, 308 en 309



naar een identieke structuur of naar een mengsel van identieke structuren omleggen, voordat ontledingsreacties plaatsvinden. Aannemelijk is, dat deze fragmentatiereacties tenminste voornamelijk plaatsvinden vanuit ion 307 of uit een ion met hetzelfde koolstofzwavelskelet, b.v. ion 312 ($[H_3C=CHSH_2]^+$). De omlegging van ion 308 naar 307 verloopt waarschijnlijk via 309.

Door middel van metingen van verschijningspotentialen en molecuulbaanberekeningen kon een potentieel energiediagram opgesteld worden, waardoor een goed inzicht verkregen is in het isomerisatiegedrag van $[C_2H_5S]^+$ -ionen.

Hoofdstuk 4 behandelt de isomerisatie- en fragmentatiereacties van $[C_3H_7S]^+$ -ionen 415 t/m 420. Ook voor deze ionen geldt, dat ze, ondanks hun verschillende beginstructuur, meestal naar hetzelfde ion of naar hetzelfde mengsel van ionen omleggen, voordat een ontleding plaatsvindt.

CH₃CH-

4.

CH₃CH₂-

4.

Door midde

(¹³C en D) zij

ion 418, of ee

van waaruit de

ionen 416 en 4

ze ontleden oo

Ook is do

kregen in de i

ionen complexe

een centrale p

Met behul

ningspotential

en ontledingsr

In Hoofds

verschillende

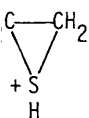
om de specifie

dien bevat dit

thetische werk

beschreven van een ont-
 ies van $[C_2H_5S]^+$ - en
 onderzocht met be-
 r.

in Hoofdstuk 1 be-
 de methoden die voor
 ter beschikking staan.
 fragmentatiereacties
 nen 307, 308 en 309

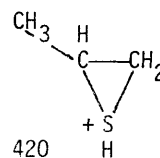
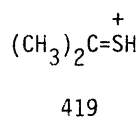
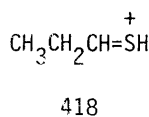
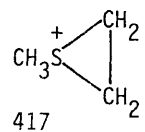
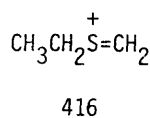
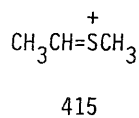


309

van identieke struc-
 tsvinden. Aannemelijk
 namelijk plaatsvinden
 stofzwavelskelet, b.v.
 3 naar 307 verloopt

potentials en mole-
 diagram opgesteld
 in het isomerisatie-

fragmentatiereacties
 onen geldt, dat ze,
 al naar hetzelfde ion
 oordat een ontleding



Door middel van markering (labelling) met stabiele isotopen (^{13}C en D) zijn er sterke aanwijzingen verkregen voor de aanname, dat ion 418, of een ion met hetzelfde koolstofzwavelskelet, het ion is van waaruit de fragmentaties optreden. Een uitzondering hierop vormen ionen 416 en 419. Deze ionen leggen maar voor een deel om naar 418; ze ontleden ook gedeeltelijk vanuit hun oorspronkelijke structuur.

Ook is door middel van deze labellingsexperimenten inzicht verkregen in de isomerisatiereacties. Hieruit blijkt, dat de $[C_3H_7S]^+$ -ionen complexe omleggingsreacties ondergaan. Ion 420 neemt hierbij een centrale plaats in.

Met behulp van resultaten, verkregen uit metingen van verschijningspotentialen is een energiediagram opgesteld voor de omleggings- en ontledingsreacties van de $[C_3H_7S]^+$ -ionen.

In Hoofdstuk 5, tenslotte, wordt de synthese beschreven van de verschillende specifiek gelabelde verbindingen, die gediend hebben om de specifiek gelabelde ionen in de gasfase te genereren. Bovendien bevat dit Hoofdstuk experimentele details, zowel over het synthetische werk als over de massaspectrometrische bepalingen.

2654
 1979